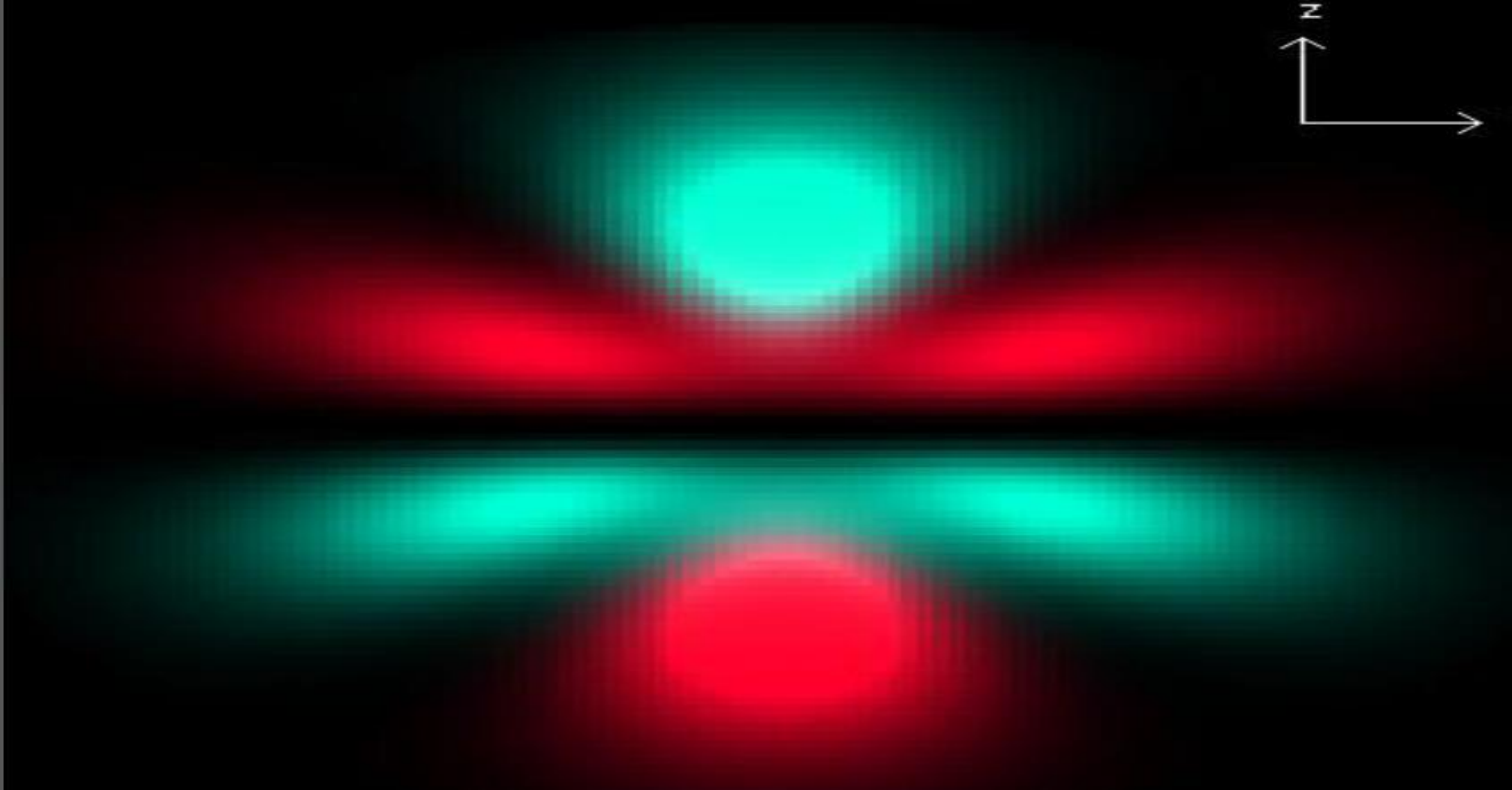







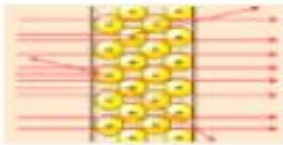


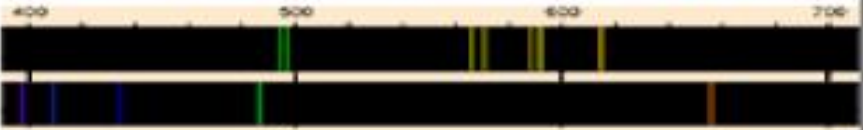
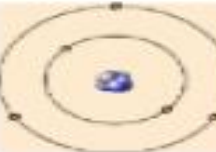




# Modelo atómico de Schrödinger

Profesor Efrén Giraldo T.



Año	Científico	Descubrimientos experimentales	Modelo atómico
1808	 John Dalton	Durante el s.XVIII y principios del XIX algunos científicos habían investigado distintos aspectos de las reacciones químicas, obteniendo las llamadas <b>leyes clásicas de la Química</b> . 	La imagen del átomo expuesta por Dalton en su <i>teoría atómica</i> , para explicar estas leyes, es la de minúsculas partículas esféricas, indivisibles e inmutables, iguales entre sí en cada elemento químico. 
1897	 J.J. Thomson	Demostó que dentro de los átomos hay unas partículas diminutas, con carga eléctrica negativa, a las que se llamó <b>electrones</b> . 	De este descubrimiento dedujo que el átomo debía de ser una esfera de materia cargada positivamente, en cuyo interior estaban incrustados los <b>electrones</b> . <i>(Modelo atómico de Thomson.)</i> 
1911	 E. Rutherford	Demostó que los átomos no eran macizos, como se creía, sino que están vacíos en su mayor parte y en su centro hay un diminuto <b>núcleo</b> . 	Dedujo que el átomo debía estar formado por una <b>coraza</b> con los <b>electrones</b> girando alrededor de un <b>núcleo central</b> cargado positivamente. <i>(Modelo atómico de Rutherford.)</i> 
1913	 Niels Bohr	<b>Espectros atómicos</b> discontinuos originados por la radiación emitida por los átomos excitados de los elementos en estado gaseoso. 	Propuso un nuevo modelo atómico, según el cual los <b>electrones</b> giran alrededor del núcleo en unos niveles bien definidos. <i>(Modelo atómico de Bohr.)</i> 

# Borh

- **Cualquiera que sea la órbita descrita por un electrón, éste no emite energía.** Las órbitas son consideradas como **estados estacionarios de energía**. A cada una de ellas le corresponde una energía, tanto mayor, cuanto más alejada se encuentre del núcleo.
- **No todas las órbitas son posibles.**
- Solamente son posibles las órbitas para las cuales el número cuántico principal ( $n$ ) toma valores enteros:  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ . **Las órbitas que se correspondan con valores no enteros del número cuántico principal, no existen.** El número cuántico principal 1, describe la orbita 1, el 2, la órbita 2 y así sucesivamente...
- **La energía liberada al caer un electrón desde una órbita superior, de energía  $E_2$ , a otra inferior, de energía  $E_1$ , se emite en forma de luz.**

- El modelo atómico de Schrödinger define al principio los electrones como ondas de materia (dualidad onda-partícula), describiendo de este modo la ecuación ondulatoria que explicaba el desarrollo en el tiempo y el espacio de la onda material en cuestión

- El electrón con su carácter ondulatorio viene definido por una función de ondas ( $\Psi$ ), usando una ecuación de ondas, que es una ecuación diferencial de segundo grado, donde aparecían derivadas segundas de  $\Psi$ .

$$\hat{\mathbf{H}} |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} |\Psi(t)\rangle + V(\hat{\mathbf{r}}, t) |\Psi(t)\rangle$$

- Cuando se resuelve esta ecuación, se ve que la función depende de unos parámetros que son los números cuánticos.
- Es por esto, que en el modelo de Schrödinger, aparece un concepto para definir la región del espacio en la cual cabría mayor posibilidad de hallar al electrón: **el orbital**.

- Aunque con la **mecánica cuántica** queda claro que no se puede saber dónde se encuentra un electrón, sí define la región en la que puede encontrarse en un momento dado
- Un orbital atómico es la región del espacio alrededor del núcleo en el que la **probabilidad** de encontrar un electrón es máxima. Cada orbital tiene asociado un valor de  $\Psi^2$  y un cierto **valor de energía**.



- La **solución matemática de la ecuación de Schrödinger** precisa de **tres números cuánticos**. Cada trío de valores de estos números describe un orbital.

## 1. # cuántico principal (n):

- Toma valores enteros (1, 2, 3,4,5,6,7) y coincide con el mismo nº cuántico introducido por Bohr.
- Este número indica la **capa cuántica principal** a la que pertenece el electrón o nivel principal de energía

El número máximo de electrones que puede contener una capa n es  $2n^2$ .

# Capa cuántica principal

# electrones:  $2n^2$

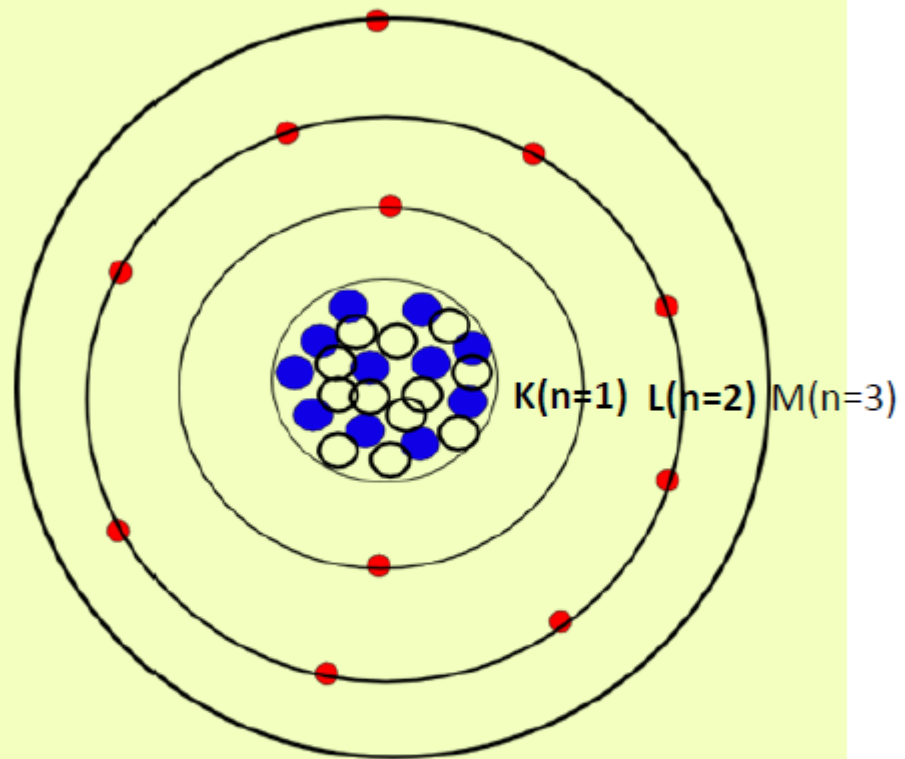
- A una capa cuántica también se le asigna una letra así:

K, L, M, N, O, P, Q

1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 **Niveles de Energía**

$2e^-$   $8e^-$   $18e^-$   $32e^-$   $50e^-$   $72e^-$   $98e^-$  **# max de elect**

# ATOMO DE SODIO



● PROTÓN: 11

● ELECTRÓN: 11

## 2.# Cuántico secundario o subniveles energéticos:

Se representa por  $\ell$  que puede tomar los valores de abajo: 0,1,2,3

- A su vez, cada nivel tiene sus electrones repartidos en distintos subniveles energéticos que pueden ser de cuatro tipos:

	s	p	d	f	
$\ell$ :	0	1	2	3	números cuánticos secundarios

Igualmente cada valor de  $\ell:(0,1,2,3)$  puede variar desde su valor - hasta el + pasando por 0, lo que genera el tercer # cuántico o magnético  $m$

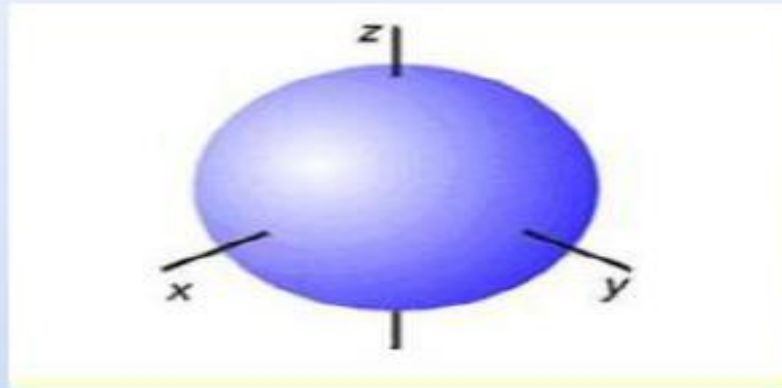
### 3. # Cuántico magnético $m_l =$ número de orientaciones espaciales

- El número cuántico magnético nos indica las cantidades de orientaciones de los orbitales en el espacio o más exactamente el # de orbitales.
- Los orbitales magnéticos son las regiones de la nube electrónica donde se encuentran los electrones
- Cada orbital solo permite 2 electrones.

Si el número cuántico  $\ell$  es el subnivel, el número  $m$  magnético representa la cantidad de valores posibles de los niveles de energía disponibles de ese subnivel, como se muestra en la tabla de abajo. Va desde  $-\ell$  hasta  $+\ell$  pasando por  $0$ .

Relación entre números cuánticos			Cantidad de #s magnéticos= orientaciones= orbitales
Orbital	Valores		Cantidad de valores de $m$
<b>s</b>	$\ell = 0, m = 0$	1 # magnético: 1 sola orientación: 1 orbital	1
<b>p</b>	$\ell = 1, m = -1, 0, +1$	3 #s magnéticos: 3 orientaciones: 3 orbitales	3
<b>d</b>	$\ell = 2, m = -2, -1, 0, +1, +2$	5 orientaciones: 5 orbitales	5
<b>f</b>	$\ell = 3, m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	7 orientaciones: 7 orbitales	7
<b>g</b>	$\ell = 4, m = -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, +4$		9

El subnivel **s** y el orbital **s** son lo mismo puesto que es esférico y solo hay una orientación

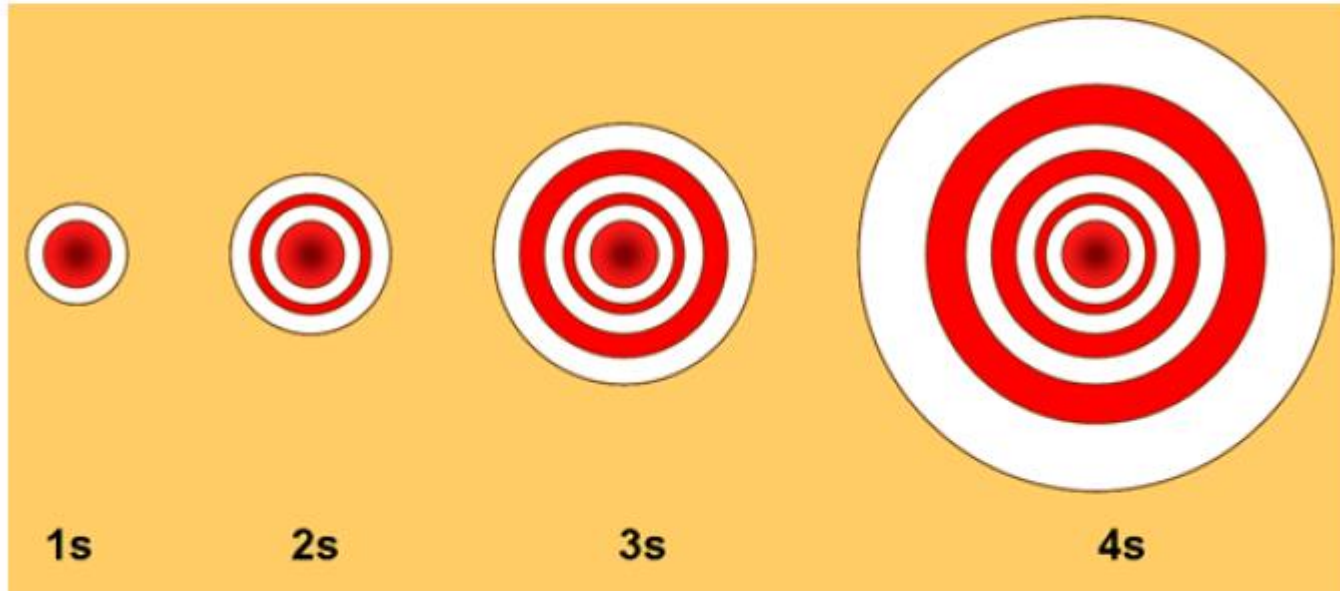


Un subnivel y orbital **s** coinciden

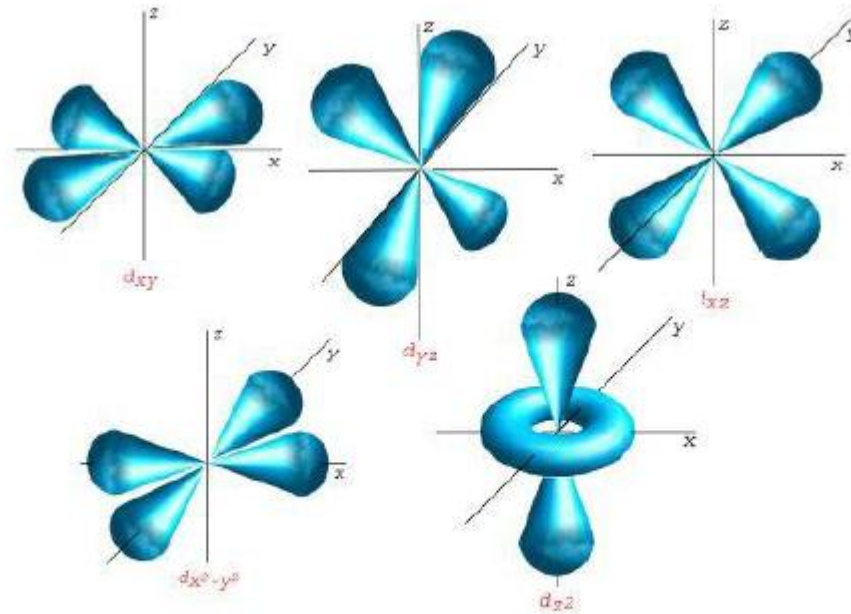
- Los límites de esta superficie esférica definen la región del espacio para la cual la probabilidad de encontrar al electrón es elevada, generalmente superior al 75%. Cualquier orbital de tipo s se representa con una superficie esférica.
- Solo admite 2 electrones



# Orbitales s

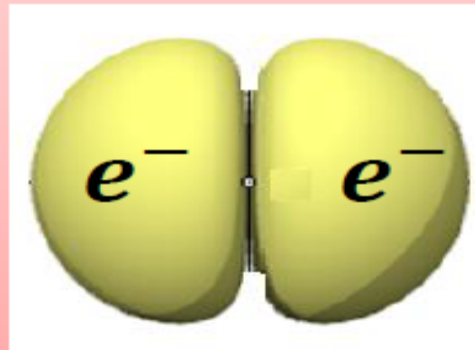


# Las Flores atómicas

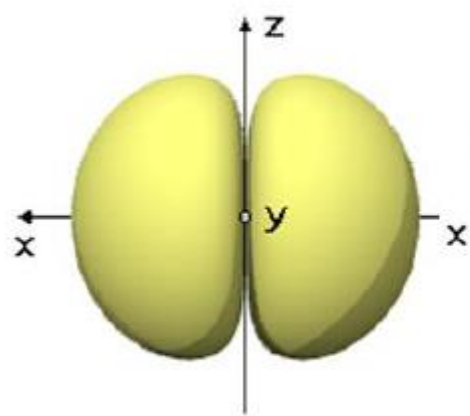


## Los orbitales p

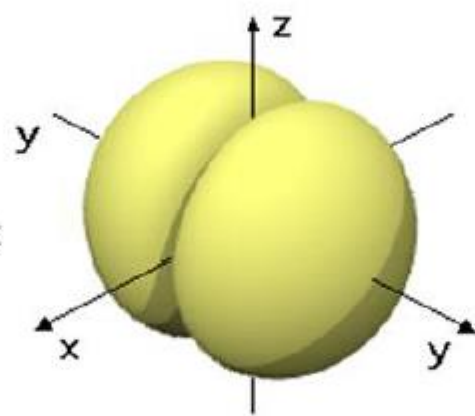
- Puesto que cada electrón requiere su propio lugar siempre aparecerá este orbital compuesto por 2 regiones contrarias: cada una para c/electrón



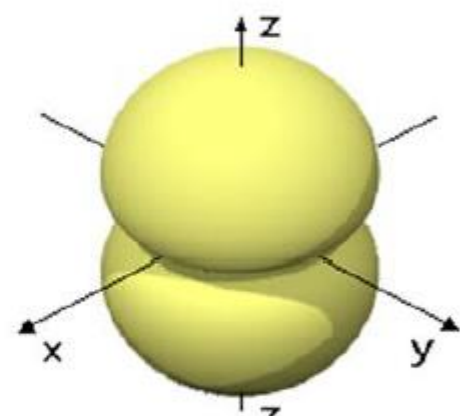
- Al orientarse en las direcciones x,y,z queda así:



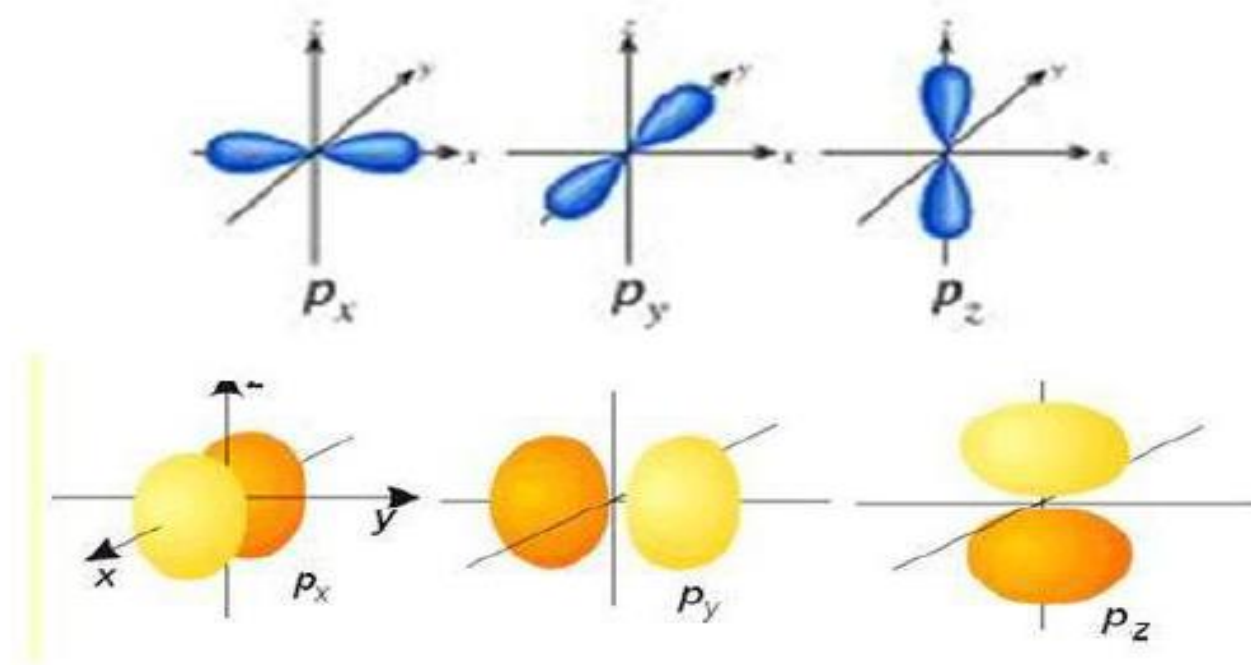
Orbital  $p_x$



Orbital  $p_y$

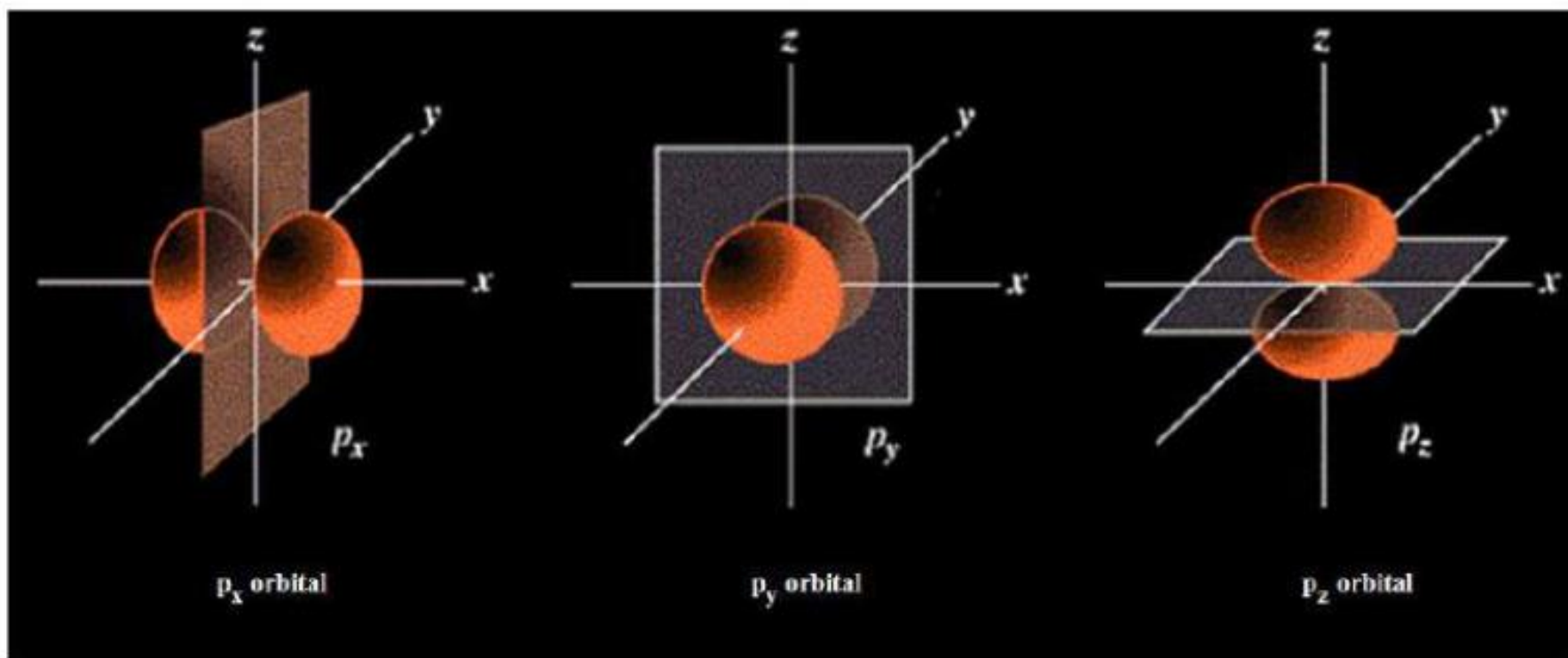


Orbital  $p_z$



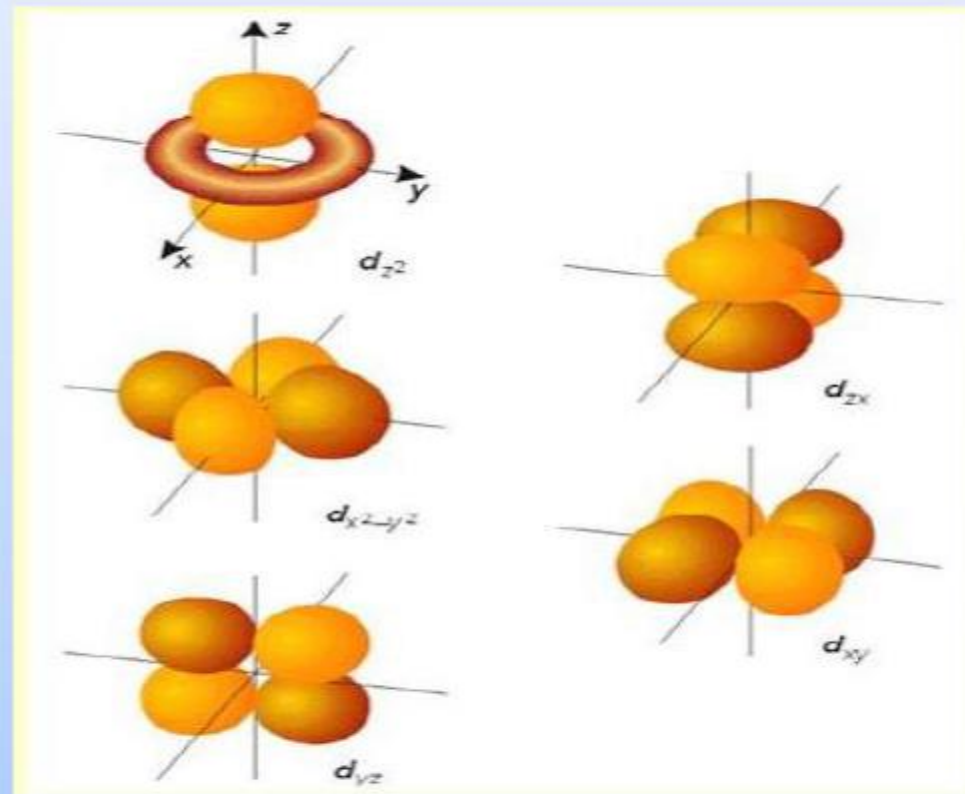
En el subnivel "p" existen tres orbitales que son  $p_x, p_y, p_z$ .  
3 orbitales **p** orientados en x, y, z

Por tanto el subnivel **p** tiene 3 orbitales con 2 electrones cada uno para dar un total de **6 electrones**

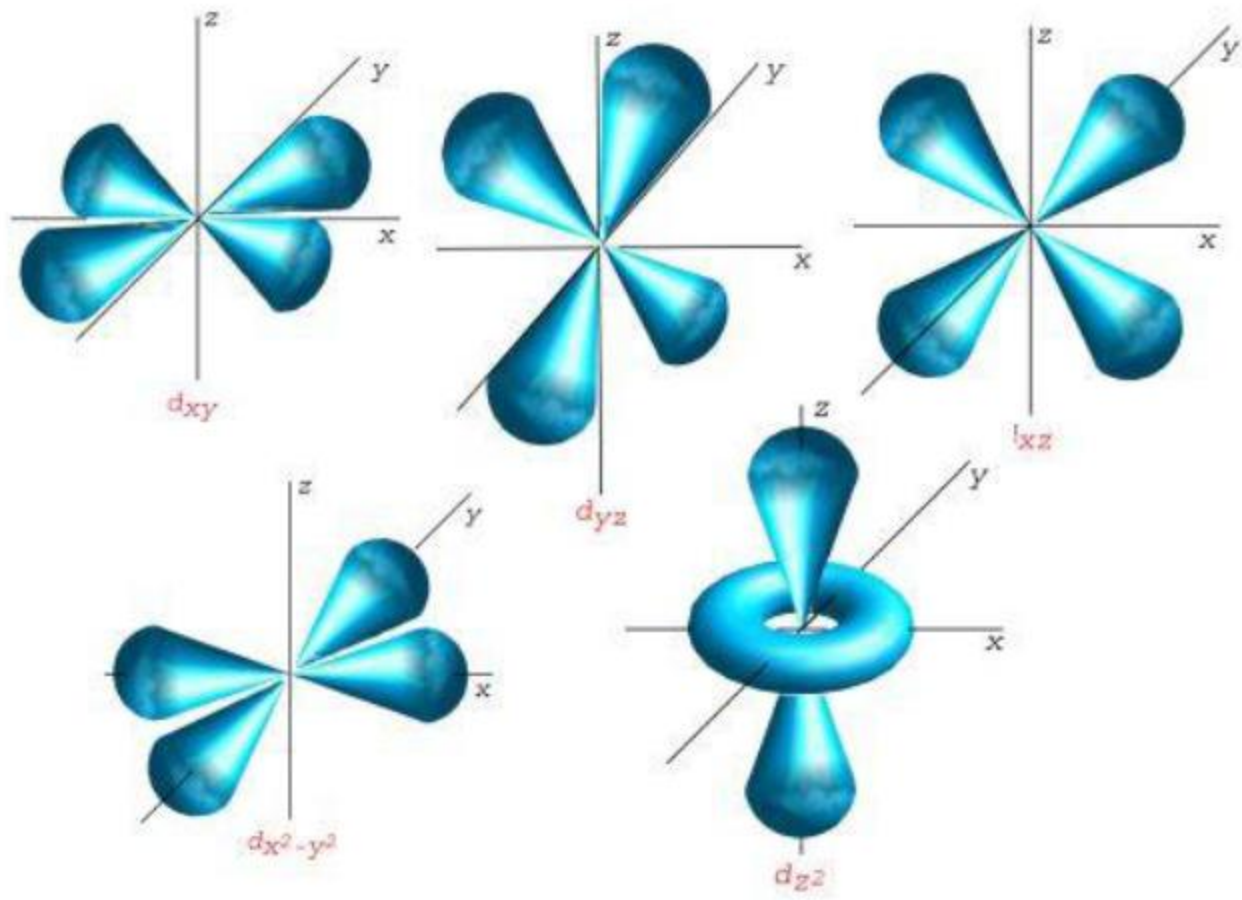


<http://library.thinkquest.org/3659/structures/shapes.html>

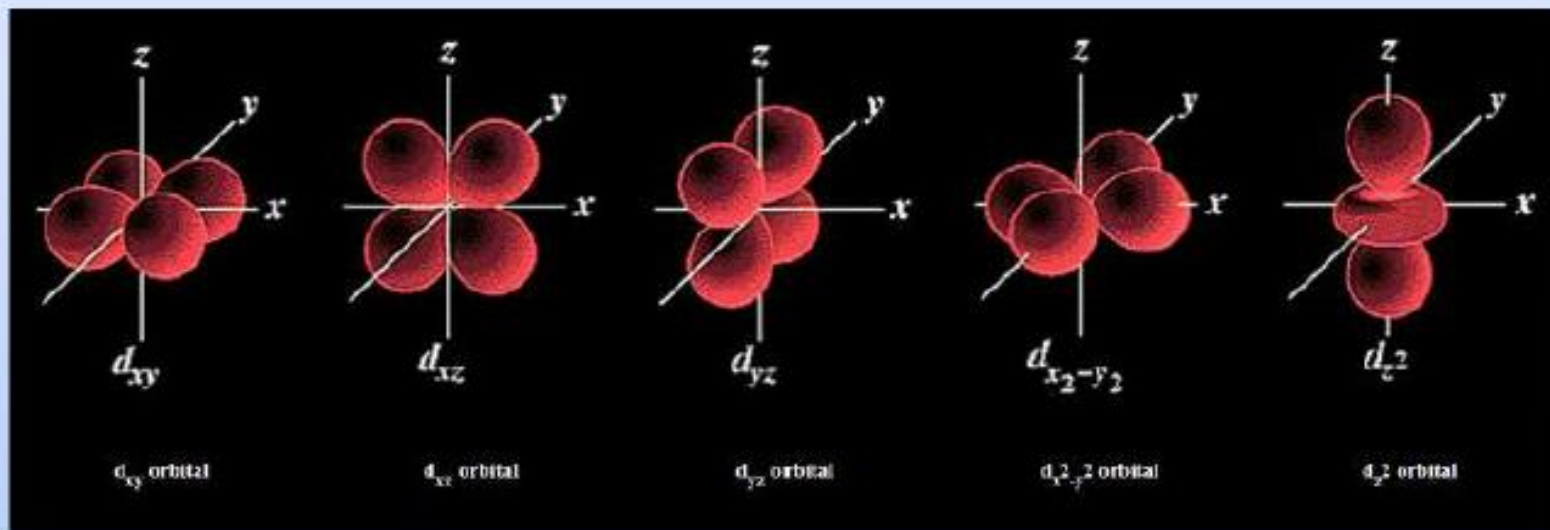
# Los orbitales d



Subnivel **d** con 5 orbitales= 10 electrones

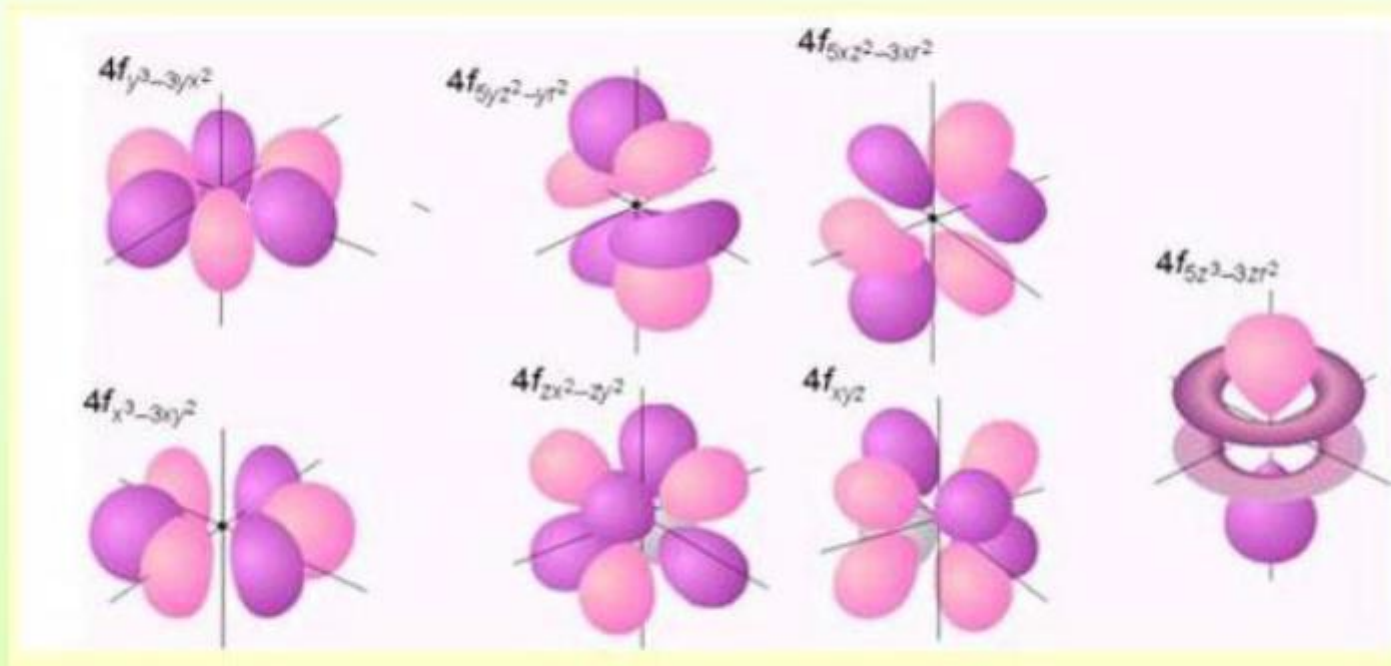






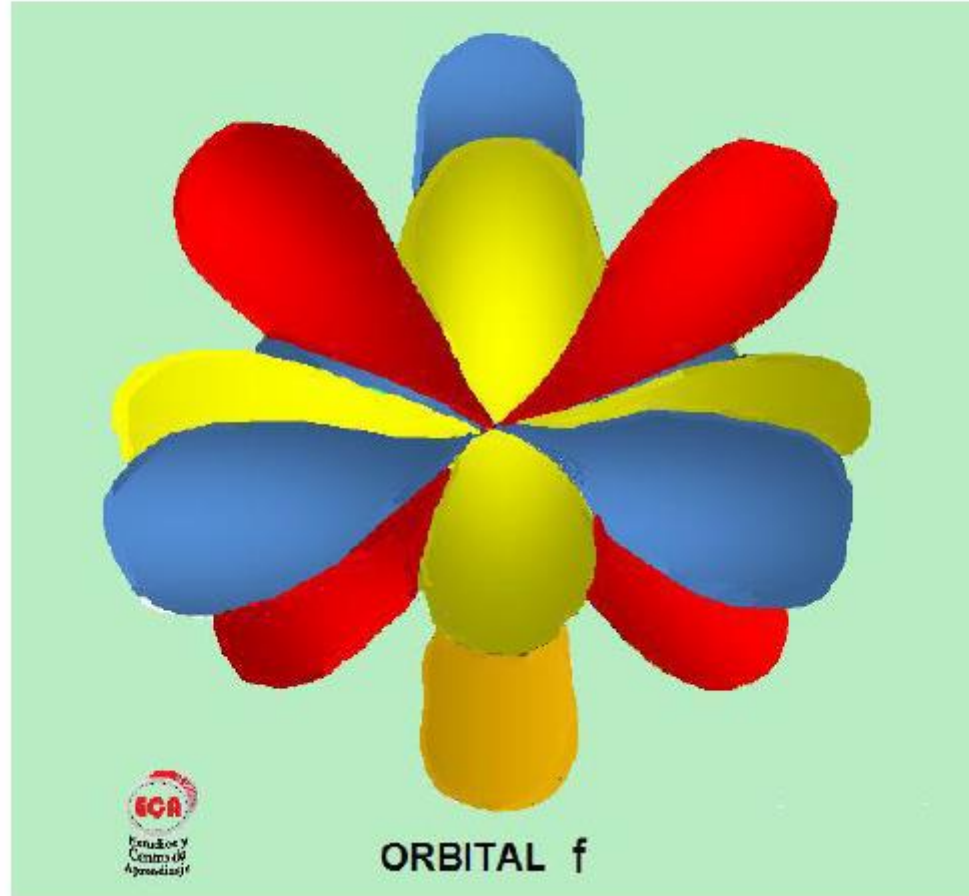
<http://library.thinkquest.org/3659/structures/shapes.html>

# Subnivel f con 7 orbitales



Tiene 14 electrones

# Reunidos



## 4. # cuántico de espín ( $m_s$ )

- Da la dirección de giro en un orbital dado de un electrón. Los 2 electrones solo pueden girar en torno a un eje, bien en el sentido de las agujas del reloj o en el sentido contrario.
- Para caracterizar esta doble posibilidad se introdujo el **nº cuántico de espín ( $m_s$ )** que toma los valores de  $+ \frac{1}{2}$  o  $- \frac{1}{2}$ .

## ∅ el principio de exclusión de Pauli:

- 2 electrones de un átomo no deben tener los cuatro números cuánticos iguales.
- Esto implica que en un mismo orbital atómico sólo pueden coexistir dos electrones con espines opuestos.

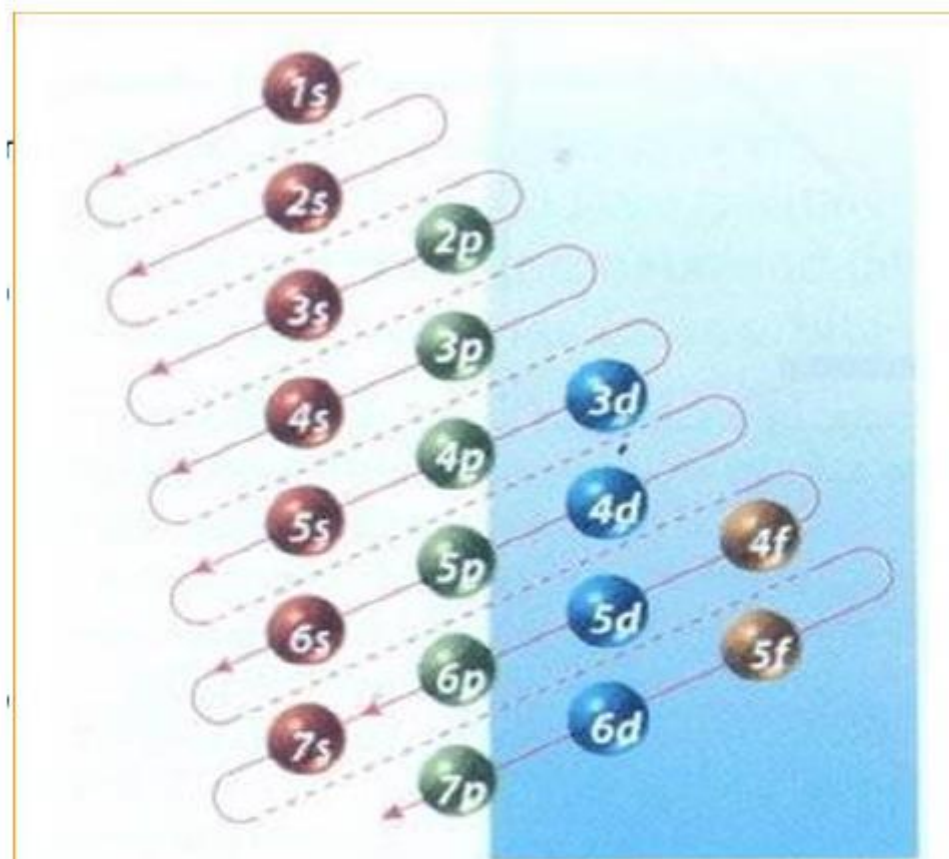
## Configuración electrónica estándar

Se representa la configuración electrónica que se obtiene usando el **cuadro de las diagonales**.

Es la manera ordenada de repartir los electrones de un átomo en los niveles y subniveles de energía.

Es importante recordar que los orbitales se van llenando en el orden en que aparecen, siguiendo esas diagonales, empezando siempre por el 1s.

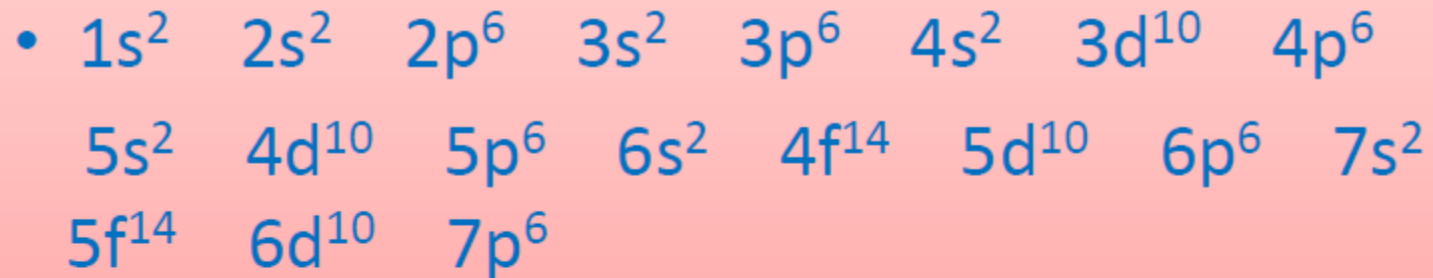
- El número que precede al orbital es igual al número cuántico principal, por ejemplo para los electrones que están en el orbital 4p, el nivel = 4.
- Recordar que el número máximo de electrones que admite cada subnivel es:
  - 2 electrones en el s ( 1 solo orbital)
  - 6 en el p (2 electrones x 3 orbitales)
  - 10 en el d (2 x 5 orbitales)
  - 14 en el f (2 x 7 orbitales)



**Cuadro de las diagonales, mecanismo para distribuir electrones en sus diferentes niveles de energía.**



- Aplicando el mencionado cuadro de las diagonales la configuración electrónica estándar, para cualquier átomo, es la siguiente:



- Para determinar la configuración electrónica de un elemento sólo hay que saber cuantos electrones debemos acomodar y distribuir en los subniveles empezando con los de menor energía e ir llenando hasta que todos los electrones estén ubicados donde les corresponde. Recordemos que partiendo desde el **subnivel s**, hacia **p**, **d** o **f** se aumenta el nivel de energía.
- En cada subnivel hay un número determinado de **orbitales** que pueden contener, como máximo, 2 electrones cada uno. Así, hay 1 orbital tipo *s*, 3 orbitales *p*, 5 orbitales *d* y 7 del tipo *f*. De esta forma el número máximo de electrones que admite cada subnivel es: 2 en el *s*; 6 en el *p* (2 electrones x 3 orbitales); 10 en el *d* (2 x 5); 14 en el *f* (2 x 7)..

- El último nivel de energía de un átomo se llama *nivel de valencia* y puede estar lleno con el número máximo de electrones permitidos o tener electrones en defecto
- Como este último nivel de energía está incompleto puede aceptar o ceder alguno de los electrones a otro átomo de otro elemento que cumpla la misma condición y así formar uniones de átomos diferentes que comparten uno o mas electrones

# Último nivel energético

- Este [enlace](#) de átomos constituye la base de la comprensión de las reacciones químicas para formar sustancias complejas a partir de elementos simples
- Cuando el último nivel está completo el átomo no puede compartir electrones siendo una sustancia muy estable y que no forma compuestos con otros elementos en condiciones normales, estas sustancias son los llamados gases nobles.

# Resumen

- **1. # Cuántico principal.** Existen 7 niveles de energía o capas donde pueden situarse los electrones para girar alrededor del núcleo, numerados del 1, el más interno o más cercano al núcleo (el que tiene menor nivel de energía), al 7, el más externo o más alejado del núcleo (el que tiene mayor nivel de energía).
- **2. # Cuántico secundario.** A su vez, cada nivel de energía o capa tiene sus electrones repartidos en distintos **subniveles**, que pueden ser de cuatro tipos: *s, p, d, f*.
- **3. # Cuántico magnético.** Cada subnivel tiene diferentes orientaciones espaciales lo que genera los orbitales
- **4. # Cuántico de Spin.** En cada orbital un  $e^-$  gira en sentido contrario al otro

- El modelo de Schrödinger, nos hace abandonar por completo el concepto anterior de los electrones, que venían definidos como pequeñísimas esferas cargadas que daban vueltas en torno al núcleo, para dar paso a ver los electrones como una función de onda, y añadiéndonos un útil concepto, el de orbital.

# Bibliografía

- <http://www.falstad.com/mathphysics.html#qm>
- <http://matomicosra.blogspot.com/2009/05/modelo-de-schrodinger.html>
- <http://www.antonibatista.es/videos/atomo%20y%20modelos%20atomicos.html>
- <http://quimicaeo10.wordpress.com/2012/04/09/4/>
- <http://rabfis15.uco.es/Modelos%20at%C3%B3micos%20.NET/modelos/ModSchrodinger.aspx>